

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2004/090066 A1

- (51) Internationale Patentklassifikation⁷: **C09K 5/10**
- (21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2004/003106
- (22) Internationales Anmeldedatum:
24. März 2004 (24.03.2004)
- (25) Einreichungssprache: Deutsch
- (26) Veröffentlichungssprache: Deutsch
- (30) Angaben zur Priorität:
103 16 418.9 10. April 2003 (10.04.2003) DE
- (71) Anmelder (*für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US*): **BASF AKTIENGESELLSCHAFT [DE/DE];**
67056 Ludwigshafen (DE).
- (72) Erfinder; und
- (75) Erfinder/Anmelder (*nur für US*): **OLBERT, Gerhard** [DE/DE]; Frankenweg 11, 69221 Dossenheim (DE). **MATTKE, Torsten** [DE/DE]; Talweide 12, 67251 Freinsheim (DE). **FIENE, Martin** [DE/DE]; Ahornweg 10, 67150 Niederkirchen (DE). **HUTTENLOCH, Oliver** [DE/DE]; Ahornweg 14, 68809 Neulussheim (DE). **HAMMON, Ulrich** [DE/DE]; Kalmitstr. 8, 68163 Mannheim (DE).
- (74) Anwalt: **ISENBRUCK, Günter**; Isenbruck Bösl Hörschler Wichmann Huhn, Patentanwälte, Theodor-Heuss-Anlage 12, 68165 Mannheim (DE).
- (81) Bestimmungsstaaten (*soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart*): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
- (84) Bestimmungsstaaten (*soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart*): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

WO 2004/090066 A1

(54) Title: USE OF AN IONIC LIQUID

(54) Bezeichnung: VERWENDUNG EINER IONISCHEN FLÜSSIGKEIT

(57) Abstract: Disclosed is the use of an ionic liquid as a heat transfer medium for indirectly delivering heat into or discharging heat from a reactor.

(57) Zusammenfassung: Es wird die Verwendung einer ionischen Flüssigkeit als Wärmeträger für die indirekte Zu- oder Abführung von Wärme aus einem Reaktor beschrieben.

Verwendung einer ionischen Flüssigkeit

Die Erfindung betrifft die Verwendung einer ionischen Flüssigkeit als Wärmeträger.

Chemische Reaktionen verlaufen häufig unter Freisetzung oder unter Zuführung von Wärme. Die Zu- oder Abführung von Wärme erfolgt dabei oft indirekt über einen Wärmeträger, der vom Reaktionsgemisch getrennt ist. Wärmeträger werden aus handelsüblichen Produkten, insbesondere anhand der folgenden notwendigen und erwünschten Eigenschaften ausgewählt:

- chemische Beständigkeit im gewünschten Druck- und Temperaturbereich,
- günstige Stoffwerte, insbesondere niedrige Viskosität, hohe Dichte, hohe Wärmeleitfähigkeit und hohe spezifische Wärme,
- niedrige Stock- oder Erstarrungstemperatur,
- nicht brennbar,
- nicht korrodierend,
- bei Anwendung ohne Aggregatzustandsänderung: niedriger Dampfdruck,
- nicht giftig oder ätzend, keine Geruchsbelästigung,
- niedrige Gesamtkosten, insbesondere in Anschaffung, Nachfüllung, Pflege und Wechsel. (Nach Ullmanns Enzyklopädie der technischen Chemie, 4. Auflage, Band 2, Verlag Chemie, Weinheim, Seiten 446 bis 449).

Bekannte, häufig benutzte Wärmeträger sind Wasser, Alkalimetall- (Natrium- oder Kalium)-Schmelzen, das Gemisch aus 53 % Kaliumnitrat, 40 % Natriumnitrit und 7 % Natriumnitrat, das unter dem Namen Hochtemperatur-Salzschmelze (HTS) bekannt ist, organische Wärmeträger, insbesondere die als Diphenyl bekannte Mischung aus Diphenyl und Diphenyloxid, Diphenyl O(ortho-Dichlorbenzol) sowie Monochlorbenzol oder Mineralöle.

Bei einer Vielzahl von Reaktionen müssen große Wärmemengen abgeführt werden, wofür häufig Wärmeträger eingesetzt werden, beispielsweise Wasser oder andere Wärmeträger, die hierbei verdampfen, das heißt die Wärme über Siedekühlung abführen. Dabei steigt mit zunehmendem Temperaturniveau der Dampfdruck an. So hat beispielsweise Wasserdampf

bei 280°C einen Druck von 70 bis 80 bar. Druckapparate sind jedoch teuer. Daher setzt man für höhere Temperaturen, insbesondere im Bereich von etwa 280 bis 400°C, in der Regel flüssige Salzsäume als Wärmeträger ein.

- 5 Die vorstehend beschriebene Hochtemperatur-Salzsäume eingesetzt, die bis zu einer Temperatur von etwa 480°C temperaturbeständig, erstarrt jedoch bei Temperaturen unterhalb von 142°C. Der Schmelzpunkt erhöht sich mit der Zeit durch Carbonatbildung im Salz. Für das Handling ist daher ein großer Aufwand erforderlich: das Aufschmelzen wird in der Regel in einem Salzsäumebehälter, charakteristisch, durchgeführt, und die
10 Schmelze wird mittels einer Pumpe oder durch Stickstoff in den Reaktor gefördert. Häufig wird nur ein Teilstrom der Hochtemperatur-Salzsäume zum Reaktor geleitet und die Hochtemperatur-Salzsäume im übrigen über einen Bypass geleitet, der ebenfalls beheizt werden muss. Darüber hinaus ist auch der Katalysatorwechsel aufwändig: hierfür muss man die Hochtemperatur-Salzsäume vollständig aus dem Reaktor entleeren oder, falls
15 man die Hochtemperatur-Salzsäume im Reaktor erkalten lässt, diese bei erneuter Inbetriebnahme wieder aufwändig aufschmelzen. Somit ist der Einsatz der Hochtemperatur-Salzsäume mit einem apparativen und operativen Aufwand zur Inbetriebnahme des Reaktors verbunden.
- 20 Darüber hinaus ist die Verwendung der Hochtemperatur-Salzsäume im Wärmeverbund einer Gesamtanlage nur unter Verwendung von vollständiger Beheizung der Rohrleitungen möglich, da die Salzmischung ansonsten in den Rohrleitungen erstarren würde.
- 25 Die Hochtemperatur-Salzsäume ist ein Sauerstoffträger und kann somit bei Leckagen der organischen Substanzen oder Substanzgemische aus dem Reaktor zu Partialoxidationen, bis zum Brand, führen und die Reaktionsrohre abschmelzen. In der Regel wird die Salzsäumeseite der Reaktoren drucklos betrieben und die das organische Reaktionsgemisch führenden Reaktionsrohre bei leichtem bis stärkerem Überdruck, um eine Verunreinigung des Reaktionsgemisches durch die Salzsäume zu vermeiden. Bei
30 Leckagen in den Rohrwänden drückt sich das organische Reaktionsgemisch automatisch durch die Undichtigkeitsstelle und reagiert auf der Salzsäumeseite mit der Salzsäume.
- 35 Für einen sicheren Betrieb mit der Hochtemperatur-Salzsäume werden die Pumpen von oben eingebaut, das heißt sie fördern in der Regel von oben nach unten. Dadurch wird der direkte Kontakt der Wellenlager und Abdichtungen mit der Hochtemperatur-Salzsäume

vermieden, da es anderenfalls zur Reaktion der Salzschmelze mit dem Lagerfett kommen kann.

Es war demgegenüber Aufgabe der Erfindung, einen Wärmeträger für Reaktoren zur Verfügung zu stellen, der die oben dargestellten Nachteile nicht aufweist. Insbesondere sollte ein für Rohrbündel-Reaktoren oder Reaktoren mit Wärmetauscherplatten geeigneter Wärmeträger zur Verfügung gestellt werden, der in einem weiten Temperaturbereich im flüssigen Aggregatzustand vorliegt und der auch die übrigen, eingangs dargelegten erforderlichen oder günstigen Eigenschaften für Wärmeträger aufweist, insbesondere 10 günstige Stoffwerte, vor allem hohe Dichte und hohe spezifische Wärme.

Demgemäß wurde überraschend gefunden, dass sich sogenannte ionische Flüssigkeiten für diesen Verwendungszweck besonders gut eignen.

15 Ionische Flüssigkeiten sind nach der Definition von Wasserscheid und Keim in: Angewandte Chemie 2000, 112, 3926 – 3945 bei relativ niedrigen Temperaturen schmelzende Salze mit nicht molekularem, ionischem Charakter. Sie sind bereits bei relativ niedrigen Temperaturen flüssig und dabei relativ niedrig viskos. Sie besitzen sehr gute Löslichkeiten für eine große Anzahl organischer, anorganischer und polymerer 20 Substanzen. Darüber hinaus sind sie in der Regel nicht brennbar, nicht korrosiv und haben keinen messbaren Dampfdruck.

In der Regel sind ionische Flüssigkeiten Substanzen, bei denen wenigstens eines der 25 beiden Ionen (Kation und/oder Anion) organischer Natur ist, d.h. wenigstens ein Kohlenstoffatom enthält.

Ionische Flüssigkeiten sind Verbindungen, die aus positiven und negativen Ionen gebildet, jedoch insgesamt ladungsneutral sind. Die positiven wie auch die negativen Ionen sind überwiegend einwertig, möglich sind jedoch auch multivalente Anionen und/oder 30 Kationen, beispielsweise mit einer bis fünf, bevorzugt mit einer bis vier, weiter bevorzugt mit einer bis drei und ganz besonders bevorzugt mit einer bis zwei elektrischen Ladungen pro Ion. Die Ladungen können sich an verschiedenen lokalisierten oder delokalisierten Bereichen innerhalb eines Moleküls befinden, also betainartig, oder auch wie ein getrenntes Anion und Kation verteilt sein. Bevorzugt sind solche ionischen Flüssigkeiten, 35 die aus mindestens einem Kation und mindestens einem Anion aufgebaut sind.

Bekannte Einsatzgebiete für ionische Flüssigkeiten sind insbesondere als Lösungsmittel für chemische Reaktionen, als Hilfsmittel zur Abtrennung von Säuren aus chemischen Reaktionsgemischen, entsprechend der nicht vorveröffentlichten deutschen Patentanmeldung mit dem Aktenzeichen 10202838.9, als Hilfsstoffe für die Extraktiv-
5 rektifikation zur Trennung engsiedender oder azeotroper Gemische, wie in WO 02/074718 beschrieben oder als Wärmeträger in solarthermischen Anlagen, entsprechend der Beschreibung in Proceedings of Solar Forum, 2001, April 21 bis 25, Washington, D.C.

Die Erfindung ist nicht eingeschränkt auf spezielle ionische Flüssigkeiten; es können alle
10 geeigneten ionischen Flüssigkeiten verwendet werden, worunter auch Gemische verschiedener ionischer Flüssigkeiten verstanden werden.

Bevorzugt sind ionische Flüssigkeiten mit möglichst niedrigem Schmelzpunkt, insbesondere unterhalb von 150°C, oder unterhalb von 140°C, oder unterhalb von 130°C,
15 weiter bevorzugt unterhalb von 80°C, besonders bevorzugt unterhalb von 25°C.

Vorteilhaft werden ionische Flüssigkeiten als Wärmeträger mit einer Betriebstemperatur, das heißt einem Temperaturbereich, in dem die ionischen Flüssigkeiten im flüssigen Aggregatzustand vorliegen, zwischen +60°C und 360°C, insbesondere zwischen 260 und
20 360°C, eingesetzt.

Bevorzugt werden ionische Flüssigkeiten der allgemeinen Formel



25

wobei n = 1,2, 3 oder 4 ist und

das Kation [A] ausgewählt ist aus

- quart. Ammonium-Kationen der allgemeinen Formel

30



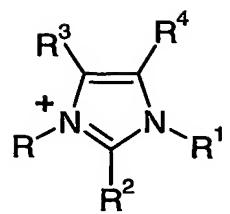
- Phosphonium-Kationen der allgemeinen Formel



35

- Imidazolium-Kationen der allgemeinen Formel

- 5 -

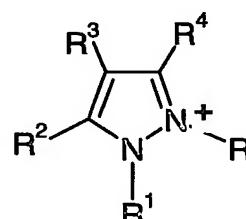


5

sowie alle, der obigen Formel analogen isomeren Imidazoliniumkationen und Imidazolidiniumkationen,

- H-Pyrazolium-Kationen der allgemeinen Formel

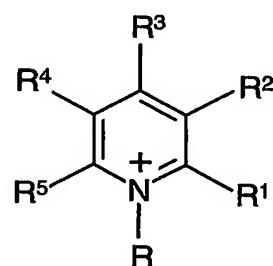
10



sowie 3H-Pyrazolium-Kationen, 4H-Pyrazolium-Kationen, 1-Pyrazolinium-Kationen, 2-Pyrazolinium-Kationen und 3-Pyrazolinium-Kationen,

15

- Pyridinium-Kationen der allgemeinen Formel

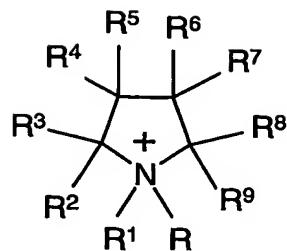


sowie Pyridazinium-, Pyrimidinium- und Pyraziniumionen,

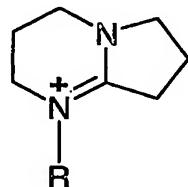
20

- Pyrrolidinium-Kationen der allgemeinen Formel

- 6 -



- fünf- bis mindestens sechsgliedrige heterocyclische Kationen, die mindestens ein Phosphor- oder Stickstoffatom sowie gegebenenfalls ein Sauerstoff- oder Schwefelatom aufweisen, wie beispielsweise Thiazolium-, Oxazolium, 1,2,4-Triazolium- oder 1,2,3-Triazolium, besonders bevorzugt solche Verbindungen, die mindestens einen fünf- bis sechsgliedrigen Heterocyclus enthalten, der ein, zwei oder drei Stickstoffatome und ein Schwefel- oder ein Sauerstoffatom aufweist, ganz besonders bevorzugt solche mit ein oder zwei Stickstoffatomen,
- 5
- und dem 1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-enium-Kation sowie dem 1,8-Diazabicyclo[4.3.0]non-5-enium-Kation:
- 10



15

sowie Oligo- und Polymere, die diese Kationen enthalten, wobei die Reste R, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁷, R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander jeweils Wasserstoff, C1 – C18-Alkyl, gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein 20 oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenes C2 – C18-Alkyl, C6 – C12-Aryl, C5 – C12-Cycloalkyl oder einen fünf- bis sechsgliedrigen, Sauerstoff-, Stickstoff- und/oder Schwefelatome aufweisenden Heterocyclus bedeuten oder zwei von ihnen gemeinsam einen ungesättigten, gesättigten oder aromatischen und gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein 25 oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenen Ring bilden, wobei die genannten Reste jeweils durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiert sein können.

Darin bedeuten gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₁ – C₁₈-Alkyl beispielsweise Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sec-Butyl, tert.-Butyl, Pentyl, Hexyl, Heptyl, Octyl, 2-Ethylhexyl, 2,4,4-Trimethylpentyl, Decyl, Dodecyl, Tetradecyl,

- 5 Hexadecyl, Octadecyl, 1,1-Dimethylpropyl, 1,1-Dimethylbutyl, 1,1,3,3-Tetramethylbutyl, Benzyl, 1-Phenylethyl, 2-Phenylethyl, α,α -Dimethylbenzyl, Benzhydryl, p-Tolylmethyl, 1-(p-Butylphenyl)-ethyl, p-Chlorbenzyl, 2,4-Dichlorbenzyl, p-Methoxybenzyl, m-Ethoxybenzyl, 2-Cyanoethyl, 2-Cyanopropyl, 2-Methoxycarbonethyl, 2-Ethoxy-carbonylethyl, 2-Butoxycarbonylpropyl, 1,2-Di-(methoxycarbonyl)-ethyl, 2-Methoxyethyl, 10 2-Ethoxyethyl, 2-Butoxyethyl, Diethoxymethyl, Diethoxyethyl, 1,3-Dioxolan-2-yl, 1,3-Dioxan-2-yl, 2-Methyl-1,3-dioxolan-2-yl, 4-Methyl-1,3-dioxolan-2-yl, 2-Isopropoxyethyl, 2-Butoxypropyl, 2-Octyloxyethyl, Chlormethyl, 2-Chlorethyl, Trichlormethyl, Trifluormethyl, 1,1-Dimethyl-2-chlorethyl, 2-Methoxyisopropyl, 2-Ethoxyethyl, Butylthiomethyl, 2-Dodecylthioethyl, 2-Phenylthioethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 2-Hydroxyethyl, 2-Hydroxypropyl, 3-Hydroxypropyl, 4-Hydroxybutyl, 6-Hydroxyhexyl, 2-Aminooethyl, 2-Aminopropyl, 3-Aminopropyl, 4-Aminobutyl, 6-Aminohexyl, 2-Methylaminooethyl, 2-Methylaminopropyl, 3-Methylaminopropyl, 4-Methylaminobutyl, 6-Methylaminohexyl, 2-Dimethylaminooethyl, 2-Dimethylaminopropyl, 3-Dimethylaminopropyl, 4-Dimethylaminobutyl, 6-Dimethylaminohexyl, 2-Hydroxy-2,2-dimethylethyl, 2-Phenoxyethyl, 20 2-Phenoxypropyl, 3-Phenoxypropyl, 4-Phenoxybutyl, 6-Phenoxyhexyl, 2-Methoxyethyl, 2-Methoxypropyl, 3-Methoxypropyl, 4-Methoxybutyl, 6-Methoxyhexyl, 2-Ethoxyethyl, 2-Ethoxypropyl, 3-Ethoxypropyl, 4-Ethoxybutyl oder 6-Ethoxyhexyl und,

- gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein 25 oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenes C₂ – C₁₈-Alkyl beispielsweise 5-Hydroxy-3-oxa-pentyl, 8-Hydroxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Hydroxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Hydroxy-4-oxa-heptyl, 11-Hydroxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Hydroxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Hydroxy-5-oxa-nonyl, 14-Hydroxy-5,10-oxa-tetradecyl, 5-Methoxy-3-oxa-pentyl, 8-Methoxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Methoxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Methoxy-4-oxa-heptyl, 11-Methoxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Methoxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Methoxy-5-oxa-nonyl, 14-Methoxy-5,10-oxa-tetradecyl, 5-Ethoxy-3-oxa-pentyl, 8-Ethoxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Ethoxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Ethoxy-4-oxa-heptyl, 11-Ethoxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Ethoxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Ethoxy-5-oxa-nonyl oder 14-Ethoxy-5,10-oxa-tetradecyl.

Bilden zwei Reste einen Ring, so können diese Reste gemeinsam bedeuten 1,3-Propylen, 1,4-Butylen, 2-Oxa-1,3-propylen, 1-Oxa-1,3-propylen, 2-Oxa-1,3-propylen, 1-Oxa-1,3-propenylen, 1-Aza-1,3-propenylen, 1-C₁-C₄-Alkyl-1-aza-1,3-propenylen, 1,4-Buta-1,3-dienylen, 1-Aza-1,4-buta-1,3-dienylen oder 2-Aza-1,4-buta-1,3-dienylen.

5

Die Anzahl der Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder Iminogruppen ist nicht beschränkt. In der Regel beträgt sie nicht mehr als 5 in dem Rest, bevorzugt nicht mehr als 4 und ganz besonders bevorzugt nicht mehr als 3.

10 Weiterhin befinden sich zwischen zwei Heteroatomen in der Regel mindestens ein Kohlenstoffatom, bevorzugt mindestens zwei.

Substituierte und unsubstituierte Iminogruppen können beispielsweise Imino-, Methylimino-, *iso*-Propylimino, n-Butylimino oder *tert*-Butylimino sein.

15

Weiterhin bedeuten funktionelle Gruppen Carboxy, Carboxamid, Hydroxy, Di-(C₁-C₄-Alkyl)-amino, C₁-C₄-Alkyloxycarbonyl, Cyano oder C₁-C₄-Alkyloxy,

gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, 20 Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₆ – C₁₂-Aryl beispielsweise Phenyl, Tollyl, Xylyl, α-Naphthyl, α-Naphthyl, 4-Diphenylyl, Chlorphenyl, Dichlorphenyl, Trichlorphenyl, Difluorphenyl, Methylphenyl, Dimethylphenyl, Trimethylphenyl, Ethylphenyl, Diethylphenyl, *iso*-Propylphenyl, *tert*-Butylphenyl, Dodecylphenyl, Methoxyphenyl, Dimethoxyphenyl, Ethoxyphenyl, Hexyloxyphenyl, Methylnaphthyl, 25 Isopropynaphthyl, Chlornaphthyl, Ethoxynaphthyl, 2,6-Dimethylphenyl, 2,4,6-Trimethylphenyl, 2,6-Dimethoxyphenyl, 2,6-Dichlorphenyl, 4-Bromphenyl, 2- oder 4-Nitrophenyl, 2,4- oder 2,6-Dinitrophenyl, 4-Dimethylaminophenyl, 4-Acetylphenyl, Methoxyethylphenyl oder Ethoxymethylphenyl,

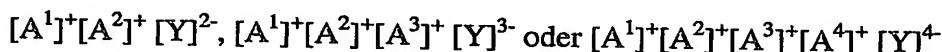
30 gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₅ – C₁₂-Cycloalkyl beispielsweise Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclooctyl, Cyclododecyl, Methylcyclopentyl, Dimethylcyclopentyl, Methylcyclohexyl, Dimethylcyclohexyl, Diethylcyclohexyl, Butylcyclohexyl, Methoxycyclohexyl, Dimethoxycyclohexyl, Diethoxycyclohexyl, 35 Butylthiocyclohexyl, Chlorcyclohexyl, Dichlorcyclohexyl, Dichlorcyclopentyl sowie ein gesättigtes oder ungesättigtes bicyclisches System wie z.B. Norbornyl oder Norbornenyl,

ein fünf- bis sechsgliedriger, Sauerstoff-, Stickstoff- und/oder Schwefelatome aufweisender Heterocyclus beispielsweise Furyl, Thiophenyl, Pyrryl, Pyridyl, Indolyl, Benzoxazolyl, Dioxolyl, Dioxy, Benzimidazolyl, Benzthiazolyl, Dimethylpyridyl, Methylchinolyl, Dimethylpyrrolyl, Methoxyfuryl, Dimethoxypyridyl, Difluorpyridyl, 5 Methylthiophenyl, Isopropylthiophenyl oder tert.-Butylthiophenyl und

C₁ bis C₄-Alkyl beispielsweise Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sec-Butyl oder tert.-Butyl.

10 Bevorzugt sind R, R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁷, R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander Wasserstoff, Methyl, Ethyl, n-Butyl, 2-Hydroxyethyl, 2-Cyanoethyl, 2-(Methoxycarbonyl)-ethyl, 2-(Ethoxycarbonyl)-ethyl, 2-(n-Butoxycarbonyl)-ethyl, Benzyl, Acetyl, Dimethylamino, Diethylamino und Chlor.

15 Zusätzlich Verwendung finden können gemischte Spezies



20 wobei A¹, A², A³ und A⁴ unabhängig voneinander aus den für [A] genannten Gruppen ausgewählt sind.

Daneben können Verwendung finden gemischte Spezies mit Metallkationen

25 $[A^1]^+[A^2]^+ [A^3]^+ [M^1]^+ [Y]^{4-}, [A^1]^+[A^2]^+ [M^1]^+ [M^2]^+ [Y]^{4-},$
 $[A^1]^+[M^1]^+ [M^2]^+ [M^3]^+ [Y]^{4-}, [A^1]^+[A^2]^+ [M^1]^+ [Y]^{3-}, [A^1]^+[M^1]^+ [M^2]^+ [Y]^{3-},$
 $[A^1]^+[M^1]^+ [Y]^{2-}, [A^1]^+[A^2]^+ [M^4]^{2+} [Y]^{4-}, [A^1]^+[M^1]^+ [M^4]^{2+} [Y]^{4-},$
 $[A^1]^+[M^5]^{3+} [Y]^{4-}, [A^1]^+[M^4]^{2+} [Y]^{3-}$

30 wobei M¹, M², M³ einwertige Metallkationen, M⁴ zweiwertige Metallkationen und M⁵ dreiwertige Metallkationen darstellen.

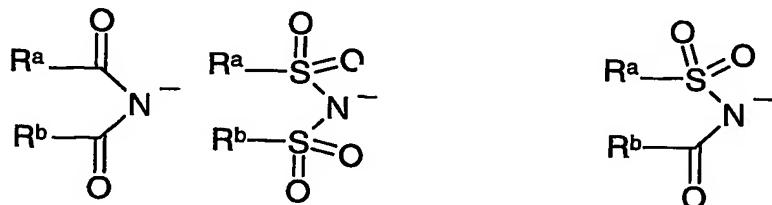
Als Anionen sind prinzipiell alle Anionen einsetzbar:

Das Anion [Y] ist bevorzugt ausgewählt aus

- der Gruppe der Halogenide bzw. halogenhaltigen Verbindungen der Formel:
 Cl^- , Br^- , BF_4^- , PF_6^- , AlCl_4^- , Al_2Cl_7^- , FeCl_4^- , BCl_4^- , SbF_6^- , AsF_6^- , ZnCl_3^- , SnCl_3^- ,
 CF_3SO_3^- , $(\text{CF}_3\text{SO}_3)_2\text{N}^-$, CF_3CO_2^- , $\text{CCl}_3\text{CO}_2^-$, CN^- , SCN^- , OCN^-

- 5 • der Gruppe der Sulfate, Sulfite oder der Sulfonate der allgemeinen Formel:
 SO_4^{2-} , HSO_4^- , SO_3^{2-} , HSO_3^- , R^aOSO_3^- , R^aSO_3^-
- der Gruppe der Phosphate der allgemeinen Formel
 PO_4^{3-} , HPO_4^{2-} , H_2PO_4^- , $\text{R}^a\text{PO}_4^{2-}$, HR^aPO_4^- , $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}_4^-$
- der Gruppe der Phosphonate oder der Phosphinate der allgemeinen Formel:
 R^aHPO_3^- , $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}_2^-$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}_3^-$
- 10 • der Gruppe der Phosphite der allgemeinen Formel:
 PO_3^{3-} , HPO_3^{2-} , H_2PO_3^- , $\text{R}^a\text{PO}_3^{2-}$, R^aHPO_3^- , $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}_3^-$
- der Gruppe der Phosphonite oder der Phosphinites der allgemeinen Formel:
 $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}_2^-$, R^aHPO_2^- , $\text{R}^a\text{R}^b\text{PO}^-$, R^aHPO^-
- 15 • der Gruppe der Carbonsäuren der allgemeinen Formel:
 R^aCOO^-
 - der Gruppe der Borate der allgemeinen Formel:
 BO_3^{3-} , HBO_3^{2-} , H_2BO_3^- , $\text{R}^a\text{R}^b\text{BO}_3^-$, R^aHBO_3^- , $\text{R}^a\text{BO}_3^{2-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{R}^c\text{R}^d\text{B}^-$
 - der Gruppe der Boronate der allgemeinen Formel:
 $\text{R}^a\text{BO}_2^{2-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{BO}^-$
- 20 • der Gruppe der Carbonate oder der Kohlensäureester der allgemeinen Formel:
 HCO_3^- , CO_3^{2-} , R^aCO_3^-
- der Gruppe der Silikate oder der Kieselsäuresäureester der allgemeinen Formel:
 SiO_4^{4-} , HSiO_4^{3-} , $\text{H}_2\text{SiO}_4^{2-}$, H_3SiO_4^- , $\text{R}^a\text{SiO}_4^{3-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{SiO}_4^{2-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{R}^c\text{SiO}_4^-$, $\text{HR}^a\text{SiO}_4^{2-}$,
 $\text{H}_2\text{R}^a\text{SiO}_4^-$, $\text{HR}^a\text{R}^b\text{SiO}_4^-$
- 25 • der Gruppe der Alkyl- bzw. Arylsilan-Salze der allgemeinen Formel:
 $\text{R}^a\text{SiO}_3^{3-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{SiO}_2^{2-}$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{R}^c\text{SiO}^-$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{R}^c\text{SiO}_3^-$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{R}^c\text{SiO}_2^-$, $\text{R}^a\text{R}^b\text{SiO}_3^{2-}$
- der Gruppe der Carbonsäureimide, Bis(sulfonyl)imide oder der Sulfonylimide der allgemeinen Formel:

30



- der Gruppe der Alkoxide oder der Aryloxide der allgemeinen Formel:
 R^aO^-
- der Gruppe der komplexen Metallionen wie $Fe(CN)_6^{3-}$, $Fe(CN)_6^{4-}$, MnO_4^- , $Fe(CO)_4^-$

5

und die Reste R^a , R^b , R^c , R^d unabhängig voneinander jeweils C1 – C18-Alkyl, gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenes C2 – C18-Alkyl, C6 – C12-Aryl, C5 – C12-Cycloalkyl oder einen fünf- bis sechsgliedrigen, 10 Sauerstoff-, Stickstoff- und/oder Schwefelatome aufweisenden Heterocyclus bedeuten oder zwei von ihnen gemeinsam einen ungesättigten, gesättigten oder aromatischen und gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenen Ring bilden, wobei die genannten Reste jeweils durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, 15 Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiert sein können.

Darin bedeuten gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₁ – C₁₈-Alkyl beispielsweise Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sec-Butyl, tert.-Butyl, Pentyl, 20 Hexyl, Heptyl, Octyl, 2-Ethylhexyl, 2,4,4-Trimethylpentyl, Decyl, Dodecyl, Tetradecyl, Hexadecyl, Octadecyl, 1,1-Dimethylpropyl, 1,1-Dimethylbutyl, 1,1,3,3-Tetramethylbutyl, Benzyl, 1-Phenylethyl, 2-Phenylethyl, α,α -Dimethylbenzyl, Benzhydryl, p-Tolylmethyl, 1-(p-Butylphenyl)-ethyl, p-Chlorbenzyl, 2,4-Dichlorbenzyl, p-Methoxybenzyl, m-Ethoxybenzyl, 2-Cyanoethyl, 2-Cyanopropyl, 2-Methoxycarbonethyl, 2-Ethoxycarbonylethyl, 2-Butoxycarbonylpropyl, 1,2-Di-(methoxycarbonyl)-ethyl, 25 2-Methoxyethyl, 2-Ethoxyethyl, 2-Butoxyethyl, Diethoxymethyl, Diethoxyethyl, 1,3-Dioxolan-2-yl, 1,3-Dioxan-2-yl, 2-Methyl-1,3-dioxolan-2-yl, 4-Methyl-1,3-dioxolan-2-yl, 2-Isopropoxyethyl, 2-Butoxypropyl, 2-Octyloxyethyl, Chlormethyl, 2-Chlorethyl, Trichlormethyl, Trifluormethyl, 1,1-Dimethyl-2-chlorethyl, 2-Methoxyisopropyl, 2-Ethoxyethyl, Butylthiomethyl, 2-Dodecylthioethyl, 2-Phenylthioethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 30 2-Hydroxyethyl, 2-Hydroxypropyl, 3-Hydroxypropyl, 4-Hydroxybutyl, 6-Hydroxyhexyl, 2-Aminoethyl, 2-Aminopropyl, 3-Aminopropyl, 4-Aminobutyl, 6-Aminohexyl, 2-Methylaminoethyl, 2-Methylaminopropyl, 3-Methylaminopropyl, 4-Methylaminobutyl, 6-Methylaminohexyl, 2-Dimethylaminoethyl, 2-Dimethylaminopropyl, 3-Dimethylaminopropyl, 4-Dimethylaminobutyl, 6-Dimethylaminohexyl, 2-Hydroxy-2,2-dimethylethyl, 2-Phenoxyethyl, 2-Phenoxypropyl, 3-Phenoxypropyl, 4-Phenoxybutyl, 35 6-

Phenoxyhexyl, 2-Methoxyethyl, 2-Methoxypropyl, 3-Methoxypropyl, 4-Methoxybutyl, 6-Methoxyhexyl, 2-Ethoxyethyl, 2-Ethoxypropyl, 3-Ethoxypropyl, 4-Ethoxybutyl oder 6-Ethoxyhexyl und,

- 5 gegebenenfalls durch ein oder mehrere Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder ein oder mehrere substituierte oder unsubstituierte Iminogruppen unterbrochenes C₂ – C₁₈-Alkyl beispielsweise 5-Hydroxy-3-oxa-pentyl, 8-Hydroxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Hydroxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Hydroxy-4-oxa-heptyl, 11-Hydroxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Hydroxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Hydroxy-5-oxa-nonyl, 14-Hydroxy-5,10-oxa-10 tetradecyl, 5-Methoxy-3-oxa-pentyl, 8-Methoxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Methoxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Methoxy-4-oxa-heptyl, 11-Methoxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Methoxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Methoxy-5-oxa-nonyl, 14-Methoxy-5,10-oxa-tetradecyl, 5-Ethoxy-3-oxa-pentyl, 8-Ethoxy-3,6-dioxa-octyl, 11-Ethoxy-3,6,9-trioxa-undecyl, 7-Ethoxy-4-oxa-heptyl, 11-Ethoxy-4,8-dioxa-undecyl, 15-Ethoxy-4,8,12-trioxa-pentadecyl, 9-Ethoxy-5-oxa-nonyl oder 14-Ethoxy-5,10-oxa-tetradecyl.

Bilden zwei Reste einen Ring, so können diese Reste gemeinsam bedeuten 1,3-Propylen, 1,4-Butylen, 2-Oxa-1,3-propylen, 1-Oxa-1,3-propylen, 2-Oxa-1,3-propylen, 1-Oxa-1,3-propenylen, 1-Aza-1,3-propenylen, 1-C₁-C₄-Alkyl-1-aza-1,3-propenylen, 1,4-Buta-1,3-dienylen, 1-Aza-1,4-buta-1,3-dienylen oder 2-Aza-1,4-buta-1,3-dienylen.

Die Anzahl der Sauerstoff- und/oder Schwefelatome und/oder Iminogruppen ist nicht beschränkt. In der Regel beträgt sie nicht mehr als 5 in dem Rest, bevorzugt nicht mehr als 4 und ganz besonders bevorzugt nicht mehr als 3.

25 Weiterhin befinden sich zwischen zwei Heteroatomen in der Regel mindestens ein Kohlenstoffatom, bevorzugt mindestens zwei.

30 Substituierte und unsubstituierte Iminogruppen können beispielsweise Imino-, Methylimino-, *iso*-Propylimino, n-Butylimino oder *tert*-Butylimino sein.

Weiterhin bedeuten funktionelle Gruppen Carboxy, Carboxamid, Hydroxy, Di-(C₁-C₄-Alkyl)-amino, C₁-C₄-Alkyloxycarbonyl, Cyano oder C₁-C₄-Alkyloxy,

35 gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₆ – C₁₂-Aryl beispielsweise Phenyl,

- Tolyl, Xylyl, α Naphthyl, α -Naphthyl, 4-Diphenyl, Chlorphenyl, Dichlorphenyl, Trichlorphenyl, Difluorphenyl, Methylphenyl, Dimethylphenyl, Trimethylphenyl, Ethylphenyl, Diethylphenyl, *iso*-Propylphenyl, tert.-Butylphenyl, Dodecylphenyl, Methoxyphenyl, Dimethoxyphenyl, Ethoxyphenyl, Hexyloxyphenyl, Methylnaphthyl,
- 5 Isopropynaphthyl, Chlornaphthyl, Ethoxynaphthyl, 2,6-Dimethylphenyl, 2,4,6-Trimethylphenyl, 2,6-Dimethoxyphenyl, 2,6-Dichlorphenyl, 4-Bromphenyl, 2- oder 4-Nitrophenyl, 2,4- oder 2,6-Dinitrophenyl, 4-Dimethylaminophenyl, 4-Acetylphenyl, Methoxyethylphenyl oder Ethoxymethylphenyl,
- 10 gegebenenfalls durch funktionelle Gruppen, Aryl, Alkyl, Aryloxy, Alkyloxy, Halogen, Heteroatome und/oder Heterocyclen substituiertes C₅ – C₁₂-Cycloalkyl beispielsweise Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cyclooctyl, Cyclododecyl, Methylcyclopentyl, Dimethylcyclopentyl, Methylcyclohexyl, Dimethylcyclohexyl, Diethylcyclohexyl, Butylcyclohexyl, Methoxycyclohexyl, Dimethoxycyclohexyl, Diethoxycyclohexyl,
- 15 Butylthiocyclohexyl, Chlorcyclohexyl, Dichlorcyclohexyl, Dichlorcyclopentyl sowie ein gesättigtes oder ungesättigtes bicyclisches System wie z.B. Norbornyl oder Norbornenyl, ein fünf- bis sechsgliedriger, Sauerstoff-, Stickstoff- und/oder Schwefelatome aufweisender Heterocyclus beispielsweise Furyl, Thiophenyl, Pyrryl, Pyridyl, Indolyl, Benzoxazolyl, Dioxolyl, Dioxy, Benzimidazolyl, Benzthiazolyl, Dimethylpyridyl,
- 20 Methylchinolyl, Dimethylpyrryl, Methoxyfuryl, Dimethoxypyridyl, Difluorpyridyl, Methylthiophenyl, Isopropylthiophenyl oder tert.-Butylthiophenyl und
- C₁ bis C₄-Alkyl beispielsweise Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sec-Butyl oder tert.-Butyl.
- 25 Bevorzugt sind R¹, R², R³, R⁴ und R⁵ unabhängig voneinander Wasserstoff, Methyl, Ethyl, n-Butyl, 2-Hydroxyethyl, 2-Cyanoethyl, 2-(Methoxycarbonyl)-ethyl, 2-(Ethoxycarbonyl)-ethyl, 2-(n-Butoxycarbonyl)-ethyl, Dimethylamino, Diethylamino und Chlor.
- 30 Besonders bevorzugt sind ionische Flüssigkeiten, die nicht korrosiv oder sogar passivierend wirken. Hierzu zählen insbesondere ionische Flüssigkeiten mit Sulfat-, Phosphat-, Borat- oder Silikatanionen. Besonders bevorzugt sind Lösungen von anorganischen Salzen in ionischen Flüssigkeiten sowie metallkationenhaltige ionische Flüssigkeiten des Typs [A¹]⁺ [M¹]⁺ [Y]²⁻, die eine verbesserte Temperaturstabilität der
- 35 ionischen Flüssigkeit bewirken. Insbesondere bevorzugt hierfür sind Alkali- und Erdalkalimetalle bzw. deren Salze.

Besonders bevorzugt sind ionische Flüssigkeiten, die als Kation ein Imidazolium-, ein Pyridinium- oder ein Phosphonium-Kation aufweisen.

5 Besonders bevorzugt sind ionische Flüssigkeiten, die als Kation ein Imidazolium- oder substituiertes Imidazolium-Kation und als Anion Hydrogensulfat enthalten, ganz besonders bevorzugt das 1-Butyl-3-Ethyl-Imidazolium-Hydrogensulfat, das sich durch eine hohe Dichte (etwa 1,25 kg/dm³ bei 100°C) und eine hohe spezifische Wärmekapazität (c_p bei 100°C von etwa 2,1 J/g.K) auszeichnet.

10 Besonders geeignet sind auch ionische Flüssigkeiten, die als Anionen Tetraalkyl-, Tetraaryl- oder Tetraalkyl-aryl-borate enthalten, ganz besonders 1-Butyl-3-Methyl-Imidazolium-Tetraphenylborat, mit einer besonders hohen spezifischen Wärmekapazität von bis zu 4 J/g.K bei 100°C.

15 In einer besonders bevorzugten Ausführungsform wird die ionische Flüssigkeit als Wärmeträger für die indirekte Zu- oder Abführung von Wärme aus einem Rohrbündelreaktor verwendet.

20 Die übliche Bauart von Rohrbündelreaktoren besteht aus einem, in der Regel zylinderförmigen Behälter, in dem ein Bündel, d.h. eine Vielzahl von Kontaktrohren in üblicherweise vertikaler Anordnung untergebracht ist. Diese Kontaktrohre, die gegebenenfalls getragerte Katalysatoren enthalten können, sind mit ihren Enden in Rohrböden abdichtend befestigt und münden in jeweils eine am oberen beziehungsweise 25 am unteren Ende mit dem Behälter verbundene Haube. Über die Hauben wird das die Kontaktrohre durchströmende Reaktionsgemisch zu- beziehungsweise abgeführt. Durch den die Kontaktrohre umgebenden Raum wird ein Wärmeträger-Kreislauf geleitet, um die Wärmebilanz, insbesondere bei Reaktionen mit starker Wärmetönung, auszugleichen. Aus wirtschaftlichen Gründen werden Reaktoren mit einer möglichst großen Zahl von 30 Kontaktrohren eingesetzt, wobei die Zahl der untergebrachten Kontaktrohre bevorzugt im Bereich von 10000 bis 30000 liegt (vgl. DE-A 44 31 949).

Bezüglich des Wärmeträger-Kreislaufs ist es bekannt, in jedem waagerechten Schnitt des Reaktors eine weitgehend homogene Temperaturverteilung des Wärmeträgers zu 35 realisieren, um möglichst alle Kontaktrohre gleichmäßig am Reaktionsgeschehen zu beteiligen (z.B. DE-B 16 01 162). Der Glättung der Temperaturverteilung dient die

Wärmezuführung beziehungsweise Wärmeabführung über jeweils an den Reaktorenden angebrachten äußereren Ringleitungen mit einer Vielzahl von Mantelöffnungen, wie sie beispielsweise in DE-B 34 09 159 beschrieben sind.

- 5 Eine weitere Verbesserung des Wärmeüberganges wird durch den Einbau von Umlenkscheiben erreicht, die abwechselnd in der Reaktormitte und am Reaktorrand einen Durchtrittsquerschnitt freilassen. Eine derartige Anordnung ist insbesondere für ringförmig angeordnete Rohrbündel mit einem freien zentralen Raum geeignet und beispielsweise aus GB-B 31 01 75 bekannt.

10

Die Erfindung ist nicht eingeschränkt auf die oben erwähnten Ausführungsformen von Rohrbündelreaktoren, insbesondere nicht auf die zylindrische Reaktorgeometrie, sondern allgemein für Rohrbündelreaktoren anwendbar.

15

Vorteilhaft ist hierbei, dass ionische Flüssigkeiten besonders günstige Stoffwerte aufweisen, insbesondere bezüglich des Produkts aus Dichte und spezifischer Wärmekapazität: Die Gegenüberstellung der maßgeblichen Stoffwerte für die klassische Salzschnmelze aus Kaliumnitrat und Natriumnitrit und für die ionische Flüssigkeit 1-Methyl-3-Octyl-Imidazolium-Hexafluorophosphat ($C_8\text{ mim}(PF_6)$)

20

	Dichte [kg/m ³]	c _p [J/kg/K]	Dichte x c _p [J/m ³ /K]
Klassische Salzschnmelze (KNO ₃ /NaNO ₂)	1820	1560	2 839 200
ionische Flüssigkeit (C ₈ mim)(PF ₆)	1400	2500	3 500 000

zeigt, dass bei gleicher Umlaufmenge die ionische Flüssigkeit ca. 23,3% mehr Wärme aufnehmen kann als die klassische Salzschnmelze. Dies hat eine Reihe von verfahrenstechnischen Vorteilen. Zum einen wird die Temperaturdifferenz des Wärmeträgers zwischen Reaktoreintritt und -austritt um ca. 1/5 geringer mit der Folge, dass die radiale Temperaturdifferenz in den Kontaktrohren über den Querschnitt des Kontaktrohrbündels geringer wird und somit die angestrebte weitestgehend homogene Temperaturverteilung, also Isothermie über den Reaktorquerschnitt verbessert wird. In der Folge ist es möglich, die maximale Hot-Spot-Temperatur-Differenz zwischen den einzelnen Kontaktrohren, beispielsweise in der Oxidationsreaktion zur Herstellung von

Phthalsäureanhydrid, von ca. 15°C in bekannten Rohrbündelreaktoren auf ca. 10°C abzusenken. Dies führt zu einer verbesserten Selektivität der Reaktion und in der Folge zu einer Erhöhung der Ausbeute. Darüber hinaus kann die Kapazität des Reaktors um bis zu 2 % gesteigert werden, ohne die Betriebssicherheit zu gefährden.

5

Darüber hinaus wird durch die verbesserte Wärmeaufnahme durch den erfundungsgemäß einzusetzenden Wärmeträger, um beispielhaft 23,3%, die für die Abführung derselben Wärmemenge erforderliche Wärmeträgermenge entsprechend, d.h. um beispielhaft 23,3% geringer. Dies ergibt enorme wirtschaftliche Vorteile, insbesondere eine Ersparnis in der Antriebsleistung der Pumpen.

10

Ionische Flüssigkeiten sind darüber hinaus in der Regel ungiftig und nicht brennbar. Ihr Einsatz ist nicht eingeschränkt auf eine spezielle Pumpenanordnung, da der Kontakt mit dem Lagerfett der Pumpen in der Regel unkritisch ist. Für ionische Flüssigkeiten, können Standardpumpen mit größeren Förderhöhen eingesetzt werden, wobei eine zusätzliche Pumpenabdichtung mit einer Sperrflüssigkeit möglich ist, die ebenfalls aus einer ionischen Flüssigkeit gebildet sein kann.

15

Die ionischen Flüssigkeiten können vorteilhaft auch als Wärmeträger in Reaktoren eingesetzt werden, die mit Wärmetauscherplatten ausgestattet sind, durch die der Wärmeträger strömt. Derartige Reaktoren sind beispielsweise in DE-A 199 52 964 beschrieben.

20

Besonders vorteilhaft ist die Verwendung von ionischen Flüssigkeiten als Wärmeträger in Reaktoren zur Durchführung von exothermen Reaktionen, insbesondere von partiellen Oxidationen, besonders bevorzugt zur Herstellung von Acrolein, Acrylsäure, Phthalsäureanhydrid, Maleinsäureanhydrid oder zur Herstellung von Chlor durch Oxidation von Chlorwasserstoff.

25

Insbesondere können ionische Flüssigkeiten zum Ersatz der Eingangs definierten klassischen Hochtemperatur-Salzschorze, zum Ersatz von Wärmeträgerölen, Monochlorbenzol sowie von Wärmeträgern, die zur Siedekühlung oder zur Kondensation von Dampf verwendet werden, in allen bekannten Einsatzbereichen der genannten Wärmeträger in Reaktoren eingesetzt werden. Beispielsweise ist es möglich, die bislang zur Herstellung von Acrylnitril-Benzol-Styrol (ABS) oder Polyamid 6.6 verwendeten Marlotherm-

30

35

- 17 -

Wärmeträgeröle oder das zur Herstellung von Phosgen eingesetzte Monochlorbenzol durch ionische Flüssigkeiten zu ersetzen.

Patentansprüche

1. Verwendung einer ionischen Flüssigkeit als Wärmeträger für die indirekte Zu- oder
5 Abführung von Wärme aus einem Reaktor.

2. Verwendung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die ionische Flüssigkeit eine Schmelztemperatur unterhalb von 150°C, bevorzugt unterhalb von 80°C, besonders bevorzugt unterhalb von 25°C, aufweist.

10 3. Verwendung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die ionische Flüssigkeit als Wärmeträger eine Betriebstemperatur zwischen +60°C und 360°C, bevorzugt zwischen 260 und 360°C hat.

15 4. Verwendung nach Ansprüchen 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass der Reaktor ein Rohrbündelreaktor ist.

20 5. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass der Reaktor mit Wärmetauscherplatten ausgestattet ist, die von der ionischen Flüssigkeit als Wärmeträger durchströmt sind.

25 6. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass man eine ionische Flüssigkeit einsetzt, die ein Sulfat-, Phosphat-, Borat- oder Silikatanion enthält.

7. Verwendung nach Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, dass die ionische Flüssigkeit ein einwertiges Metall-Kation, insbesondere ein Alkalimetall-Kation sowie ein weiteres Kation, insbesondere ein Imidazolium-Kation, enthält.

30 8. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass man eine ionische Flüssigkeit einsetzt, die als Kation ein Imidazolium-, Pyridinium- oder Phosphonium-Kation enthält.

35 9. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 7 für die Abführung der Reaktionswärme einer exothermen Reaktion, insbesondere einer partiellen Oxidation, besonders bevorzugt zur Herstellung von Acrolein, Acrylsäure,

- 19 -

Phthalsäureanhydrid, Maleinsäureanhydrid oder zur Herstellung von Chlor durch Oxidation von Chlorwasserstoff.

- 5 10. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, dass man die ionische Flüssigkeit als Ersatz für die Hochtemperatur-SalzsSchmelze, für ein Wärmeträgeröl, für Monochlorbenzol oder für einen Wärmeträger, der zur Siedekühlung oder zur Kondensation von Dampf verwendet wird, einsetzt.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
PCT/EP2004/003106

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
IPC 7 C09K5/10

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
IPC 7 C09K

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, COMPENDEX, WPI Data, PAJ

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	PROCEEDINGS OF SOLAR FORUM 2001, APRIL 21-25, WASHINGTON DC, 2001, XP002288360 cited in the application the whole document	1-10
Y	DE 101 45 747 A (SOLVENT INNOVATION GMBH) 3 April 2003 (2003-04-03) claims 1-5, 12, 17	1-10
Y	DE 44 31 949 A (BASF AG) 16 March 1995 (1995-03-16) cited in the application claims	1-10
Y	DE 199 52 964 A (BASF AG) 10 May 2001 (2001-05-10) cited in the application column 4, line 58 - line 64; claims	1-10

Further documents are listed in the continuation of box C. Patent family members are listed in annex.

* Special categories of cited documents :

- "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- "E" earlier document but published on or after the International filing date
- "L" document which may throw doubts on priority, claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- "P" document published prior to the International filing date but later than the priority date claimed

- "T" later document published after the International filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
- "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
- "&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the International search

14 July 2004

Date of mailing of the International search report

23/07/2004

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel: (+31-70) 340-2040, Tx: 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Puetz, C

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP2004/003106

Patent document cited in search report	Publication date		Patent family member(s)		Publication date
DE 10145747	A	03-04-2003	DE WO EP	10145747 A1 03022812 A1 1425268 A1	03-04-2003 20-03-2003 09-06-2004
DE 4431949	A	16-03-1995	DE CA CN CZ DE EP ES JP US	4431949 A1 2157632 A1 1138570 A ,B 9502294 A3 59501356 D1 0700893 A1 2112591 T3 8092154 A 5739391 A	16-03-1995 09-03-1996 25-12-1996 13-03-1996 05-03-1998 13-03-1996 01-04-1998 09-04-1996 14-04-1998
DE 19952964	A	10-05-2001	DE WO EP JP	19952964 A1 0132301 A1 1232004 A1 2003513056 T	10-05-2001 10-05-2001 21-08-2002 08-04-2003

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2004/003106

A. KLASIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
IPK 7 C09K5/10

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierte Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
IPK 7 C09K

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, COMPENDEX, WPI Data, PAJ

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	PROCEEDINGS OF SOLAR FORUM 2001, APRIL 21-25, WASHINGTON DC, 2001, XP002288360 in der Anmeldung erwähnt das ganze Dokument	1-10
Y	DE 101 45 747 A (SOLVENT INNOVATION GMBH) 3. April 2003 (2003-04-03) Ansprüche 1-5, 12, 17	1-10
Y	DE 44 31 949 A (BASF AG) 16. März 1995 (1995-03-16) in der Anmeldung erwähnt Ansprüche	1-10
Y	DE 199 52 964 A (BASF AG) 10. Mai 2001 (2001-05-10) in der Anmeldung erwähnt Spalte 4, Zeile 58 - Zeile 64; Ansprüche	1-10

Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen

Siehe Anhang Patentfamilie

- * Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :
- "A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
- "E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
- "L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
- "O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Aussistung oder andere Maßnahmen bezieht
- "P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

- "T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem Internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist
- "X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung, die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden
- "Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist
- "&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der Internationalen Recherche

Absendedatum des Internationalen Recherchenberichts

14. Juli 2004

23/07/2004

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31651 epo nl,
Fax (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Puetz, C

INTERNATIONALES RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2004/003106

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument		Datum der Veröffentlichung		Mitglied(er) der Patentfamilie		Datum der Veröffentlichung
DE 10145747	A	03-04-2003	DE	10145747 A1		03-04-2003
			WO	03022812 A1		20-03-2003
			EP	1425268 A1		09-06-2004
DE 4431949	A	16-03-1995	DE	4431949 A1		16-03-1995
			CA	2157632 A1		09-03-1996
			CN	1138570 A ,B		25-12-1996
			CZ	9502294 A3		13-03-1996
			DE	59501356 D1		05-03-1998
			EP	0700893 A1		13-03-1996
			ES	2112591 T3		01-04-1998
			JP	8092154 A		09-04-1996
			US	5739391 A		14-04-1998
DE 19952964	A	10-05-2001	DE	19952964 A1		10-05-2001
			WO	0132301 A1		10-05-2001
			EP	1232004 A1		21-08-2002
			JP	2003513056 T		08-04-2003